

Posudek oponenta diplomové práce

Autor: Bc. et Bc. Jakub Kubečka

Studijní obor: Fyzikální chemie

Název práce: Počítačové modelování difúze v polymerních roztocích

Oponent: RNDr. Radek Šachl, Ph.D.

Proces kondenzace protiontů v blízkosti nabitě polymerní molekuly stále patří k ne zcela probádané oblasti fyzikální chemie. Ke studiu tohoto problému bylo doposud využito velké množství technik. Fluorescenční korelační spektroskopie (FCS) se stala hojně využívanou v oblasti biofyziky, v oboru polymerní chemie je však využívána poměrně zřídka. Výstupem této techniky je takzvaná autokorelační funkce (ACF), která obsahuje informaci o veškerých procesech, které ovlivňují fluktuaci fluorescenčního signálu z malého ozářeného (fokálního) objemu. Takovými procesy mohou být například difúze jednotlivých fluorescenčních molekul z a do fokálního objemu, přechod molekul do nezářivého stavu ale i subdifúzní pohyby fluorescenčně označených molekul. Autor předkládané diplomové práce se rozhodnul pomocí simulací založených na molekulární dynamice (MD) prozkoumat použitelnost této techniky při studiu kondenzace protiontů v okolí polyelektrolytů. Autor vygeneroval pomocí MD simulací sadu ACF, které se pokusil nafitovat několika analytickými modely: i) modelem uvažujícím volnou difúzi jednoho nebo dvou typů emitujících částic lišícími se difúzním koeficientem; ii) modelem uvažujícím jednoduchou kinetiku difundující polymer + difundující fluorescenční protion \leftrightarrow difundující fluorescenční polymer a iii) a tzv. dekompozičním modelem, jenž sám navrhnul. Poměrně rychle však dochází k závěru, že ani jeden z modelů nepopisuje proces kondenzace dostatečně přesně, a to především pro malé velikosti fokálního objemu. Jako důvod uvádí přítomnost subdifúzních pohybů molekul, které ani jeden z modelů neuvažuje. Práce je napsaná srozumitelně a přehledně v anglickém jazyce v rozsahu 80 stran.

K předkládané práci mám následující připomínky či dotazy: 1) Autor testuje použitelnost fitovacích modelů ne na experimentálně obdržených datech nýbrž na datech vygenerovaných pomocí 'coarse grain' MD simulací, jež nemusí zcela správně popisovat reálné chování. Proto by mě zajímalo, jak autor otestoval oprávněnost tohoto přístupu. 2) Autor poměrně rychle zavrhuje všechny fitovací modely, aniž by diskutoval, za jakých podmínek se zoptimalizované fitovací parametry nejlépe shodují se vstupními parametry MD simulací. Předpokládám, že všechny typy D ale i parametry η a Q lze obdržet nezávisle na fitování ACF, tudíž se porovnání přímo nabízí. 3) Vzhledem ke složitosti subdifúzních pohybů lze vůbec odvodit analytický model dostatečně dobře popisující daný systém? 4) Autor uvádí na straně 59, že velikost fokálního objemu charakterizovaná parametrem ω je 250 μm . Uvažující numerickou aparaturu objektivu 1.4 pro jakou vlnovou délku bychom obdrželi tak velký fokální objem? 5) Lze na základě předkládané práce učinit odhad, jak dobře by použité modely popisovaly experimentální data obdržená pomocí klasické FCS (s typickým ω)? 6) Na konci diplomové práce se autor zabývá kondenzací multivalentních iontů na polymerním řetězci, aniž by diskutoval, jak dobře fungují testované fitovací modely pro tento případ. Jak to tedy vypadá?

Závěrem bych chtěl poznamenat, že autor touto prací dokázal, že je schopen vyprodukovat originální výsledky, přehledně je shrnout, výsledky řádně diskutovat a vyvodit patřičné závěry.

Tato diplomová práce splňuje v mých očích obecné požadavky na diplomovou práci. Proto navrhuji hodnocení **v ý b o r n ě**.

V Praze 15. května 2017

RNDr. Radek Šachl, Ph.D.